

論文審査の結果の要旨

氏名：竹 内 嵩

博士の専攻分野の名称：博士（工学）

論文題名：A Study of Light-Matter Interaction in Mesoscopic Region by Maxwell-Schrödinger Hybrid Simulation
(Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法によるメゾスコピック領域における光と物質の相互作用に関する研究)

審査委員：（主査） 教授 大 貫 進一郎

（副査） 教授 山 崎 恆 樹 教授 中 川 活 二

准教授 佐 甲 徳 栄

光学素子の更なる小型化や光の局在化を目的としたプラズモニック素子の設計・開発，次世代の超高速計算機として期待される量子コンピュータの実現に向けた光による量子状態の制御などは，工学的応用の観点から大変注目されている．これに伴い，数値シミュレーションによる光と物質の相互作用の解析も重要性を増し，高精度化，高速化，大規模化に向けた解析法が提案されている．光と物質の相互作用の数値シミュレーションに関する様々な報告はなされているが，従来から用いられる解析法には次のような問題点があった．

(A-1)プラズモニック素子の設計に必要な電子数が多い金属薄膜などの解析には，光と物質を古典論のみでモデル化する手法が広く用いられる．しかし，解析法の適用限界については十分検討されていなかった．

(A-2)光による少数電子の量子状態制御の数値シミュレーションでは，電子が生成する局所的な近接場の影響は検討されていなかった．

これらは，光および物質を古典論あるいは量子論のみでモデル化することに起因し，信頼性の高い光と物質の相互作用を数値シミュレーションにより求めることは困難であった．上記の問題点を解決するため，申請者は光を Maxwell 方程式，物質を Schrödinger 方程式によりモデル化し，メゾスコピック領域における光と物質の相互作用に対して信頼性の高いシミュレーションが可能となる，革新的な数値解析法を開発した．

本論文は，メゾスコピック領域における光と物質の相互作用の数値シミュレーションを実現する，Maxwell-Schrödinger方程式混合数値解析法を新規開発し，その正当性と有効性を主に次の点から得られた成果に対してまとめたものである．

(B-1)電子数が多い場合の光と物質の相互作用

(B-2)単一電子の場合の光と物質の相互作用

本論文は4章から構成されている．以下に各章で得られた主な成果を述べる．

「第1章 Introduction (序論)」では，研究の背景，研究の目的，記号と用語，について述べている．

「第2章 Light-matter interaction: many-electron systems (電子数が多い場合の光と物質の相互作用)」では，上記(A-1)の問題点を解決するために，信頼性の高いMaxwell-Schrödinger方程式混合数値解析法から得られた結果を参照解とし，現在広く利用される，古典論のみで光と物質を扱うMaxwell-Newton法の適用限界を次の点から明らかにしている．

(C-1)プラズモニック素子表面における光と物質の相互作用を考慮するため，金属の薄膜モデルを解析した．薄膜の光学特性は，多数の電子の平均的な振る舞いとして扱った．

(C-2)入射レーザーはガウシアンパルスとし，電子はレーザーの偏光方向に沿ってポテンシャルに束縛されていると仮定した．なお，ポテンシャル構造は特徴的な3種類を選択した．

(C-3)ポテンシャル構造が調和振動子の場合，Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法と量子効果を考慮しない古典的な Maxwell-Newton 法で，同様な結果が得られた．これは，Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法から求めた電子波束が，初期形状を保ったまま古典軌道と同様の運動をするためである．

(C-4)ポテンシャル構造が局所的に非調和性を有する場合，Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法の結果と，Maxwell-Newton 法の結果との違いは顕著であった．Maxwell-Schrödinger 方程式混合数

値解析法では、非調和性を生ずる局所的なポテンシャル障壁に電子波束が衝突する度、トンネル効果から波束が分かれ、波束間での干渉が起きることを明らかにした。また、古典的な Maxwell-Newton 法には波束の干渉は存在しない。

- (C-5)緩やかな非調和性を有するポテンシャル構造の場合、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法の結果と Maxwell-Newton 法の結果は、入射レーザーが薄膜を通過するまではほぼ一致し、時間経過と共に差異を生じた。Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法で計算した電子波束は、運動方向が変化する度に幅の広がる、ディフュージング効果が存在する。一方、Maxwell-Newton 法から求めた結果では同効果が存在しないため、両者の波形にずれが生じた。

「第3章 Light-matter interaction: single-electron systems (単一電子の場合の光と物質の相互作用)」では、(A-2)の問題点を解決するため、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を用いて単一電子が生成する近接場の影響を明らかにした。更に Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を応用して、量子状態を制御する新しい光パルス設計法を開発し、その有用性を検証した。数値シミュレーションから得られた成果は以下の通りである。

- (D-1)量子ドットを想定した細管を解析モデルとした。細管中には単一電子が拘束されており、一軸方向のみの自由度を仮定した。
- (D-2)近接場の影響を考慮しない従来法で設計した光パルスを入射し、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法により量子状態の制御を検証した。
- (D-3)単一電子が作る近接場は、電子近傍においてその影響を無視できず、入射した光パルスに局所的な変化を与えるため、量子状態の制御は困難となった。併せて、波動関数の振幅に対する近接場の影響を明らかにした。
- (D-4)Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を応用し、近接場の影響を考慮した光パルスの新しい設計法を開発した。
- (D-5)新規手法を用いて光パルスを設計し、その制御性能について検証を行った。電子が生成する近接場の影響を考慮した光パルスを用いることで、量子状態の安定した制御を実現した。更に、近接場の影響に応じて適切な光パルスが設計できることを明らかにした。

「第4章 Conclusion (結言)」では、本研究で得られた成果をまとめている。

以上、本論文の成果を通観すると、申請者は、光と物質の相互作用の数値シミュレーションに対して、信頼性の高い Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を開発し、その妥当性と有効性を示した。また、電子の量子状態を光で制御する光パルス設計に Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を適用し、新しい知見を得ている。これらの成果は上記 (B-1)、(B-2) に対して次のように要約できる。

(B-1) 電子数が多い場合の光と物質の相互作用

- (E-1)Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法は物質中の電子を拘束するポテンシャル構造に依らず、信頼性の高い解析結果が得られる。
- (E-2)ポテンシャル構造が調和振動子の場合、Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法と、古典論のみでモデル化した Maxwell-Newton 法の結果は等価となる。
- (E-3)非調和型のポテンシャル構造の場合、トンネル効果やディフュージング効果を考慮できる Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法のみ信頼性の高い結果が得られる。同効果を考慮できない Maxwell-Newton 法の信頼性は低い。

(B-2) 単一電子の場合の光と物質の相互作用

- (E-4)光パルスにより電子の量子状態を制御する場合、電子が生成する近接場を考慮しない従来法により設計した光パルスは、局所的に強い近接場の影響下において制御精度は低下する。
- (E-5)Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法を応用した新しい光パルス設計法を提案した。新規手法では近接場の影響を考慮したパルス設計が可能であり、新規光パルスを用いることで電子の量子状態を安定に制御できる。

これらの成果は計算電磁気学、エレクトロニクスシミュレーション、複合物理計算などの研究分野で既に大きな影響を与え、高い評価を得ている (平成25年3月電子情報通信学会 学術奨励賞, 平成27年9月 The

Japan National Committee of URSI URSI-JRSM 2015 Student Paper Competition First Prize など受賞) .

このことは、本論文の提出者が自立して研究活動を行い、又はその他の高度な専門的業務に従事するに必要な能力及びその基礎となる豊かな学識を有していることを示すものである。

よって本論文は、博士（工学）の学位を授与されるに値するものと認められる。

以 上

平成28年2月18日